平成２０年前期　固体電子工学　中間試験　解答（50 点満点）

１．(17 点)

(1) （各 1 点、計 4 点） A-C: $\sqrt{2}$ d,　A-D: $\sqrt{3}$ d,　A-E: 2d,　A-F: $\sqrt{6}$ d

(2) （各 1 点、計 5 点） A-B: 12,　A-C: 6,　A-D: 24,　A-E: 12,　A-F: 8

(3) （各 1 点、計 2 点） $d = \left(\frac{2A_{12}}{A_6}\right)^{1/6}\sigma$, $U = -\frac{\varepsilon N A_6^2}{2A_{12}}$

(4) （各 1 点、計 2 点）

$$A_{12} = 12 + \frac{6}{2^6} + \frac{24}{3^6} + \frac{12}{2^{12}} + \frac{8}{6^6} = 12.13$$

$$A_6 = 12 + \frac{6}{2^3} + \frac{24}{3^3} + \frac{12}{2^6} + \frac{8}{6^3} = 13.86$$

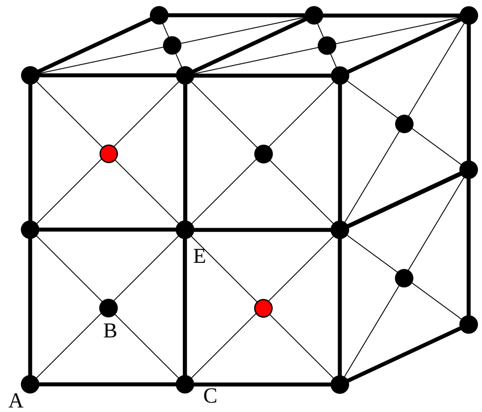
(5) （各 0.5 点、計 4 点） $a = \sqrt{2}\left(\frac{2A_{12}}{A_6}\right)^{1/6}\sigma$ = 1.552σ, $\frac{U}{N} = -\frac{\varepsilon A_6^2}{2A_{12}}$ =-7.918ε

	Ne	Ar	Kr	Xe
a (nm)	0.43	0.53	0.57	0.62
-U/N (meV)	25	82	110	160

（参考）

試験中に A-F よりも近い原子があることに気付きました。下図、赤い原子。
この原子の距離は $\sqrt{5}$ d、A の周りに 24 個あります。これを考慮すると、A_{12}=12.13, A_6=14.05 になります。結果、a = 1.549σ, U/N=-8.137ε となり、以下のように計算されます。

	Ne	Ar	Kr	Xe
a (nm)	0.43	0.53	0.57	0.62
-U/N (meV)	25	85	114	163



２．(16 点)

(1)　(計 5 点)

A:　$-\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}$　, B:　$2\vec{b}+2\vec{c}$, C:　$-\vec{b}$　より

$$\overrightarrow{OP}=-\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}+t\left(\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}\right)+u\left(\vec{a}-2\vec{b}-\vec{c}\right)=\left(-1+t+u\right)\vec{a}+\left(1+t-2u\right)\vec{b}+\left(1+t-u\right)\vec{c}$$

1+t-2u=0, 1+t-u=0　を解くと　t=-1, u=0。これを-1+t+u に代入して　$-2\vec{a}$

-1+t+u=0, 1+t-u=0　を解くと　t=0, u=1。これを 1+t-2u に代入して　$-\vec{b}$

-1+t+u=0, 1+t-2u=0　を解くと　t=1/3, u=2/3。これを 1+t-u に代入して　$2\vec{c}/3$

これから$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$との交点の逆数は　-1/2, -1, 3/2　となる。全体に 2 を掛けて、-1, -2, 3　を得る。ミラー指数$\left(\bar{1}\bar{2}3\right)$, あるいは六方格子の 4 指標を用いて$\left(\bar{1}\bar{2}33\right)$

(2)　(計 5 点)

$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$の逆格子ベクトルは$2\pi\begin{pmatrix}\frac{1}{a} & \frac{1}{\sqrt{3}a} & 0\end{pmatrix}$, $2\pi\begin{pmatrix}0 & \frac{2}{\sqrt{3}a} & 0\end{pmatrix}$, $2\pi\begin{pmatrix}0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}a}\end{pmatrix}$

これから$\left(\bar{1}\bar{2}3\right)$に対応するベクトルは$2\pi\begin{pmatrix}-\frac{1}{a} & -\frac{5}{\sqrt{3}a} & \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}a}\end{pmatrix}$となり、面間隔は

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{\left|\overrightarrow{G_{hkl}}\right|}=\sqrt{\frac{24}{305}}a=0.28a$$

(3)　(計 3 点)（１）でミラー指数を求めるときに、２を掛けたことから、ＡＢＣの面は原点から２番目に近い面となる。従って、ＡＢＣ面と原点との間には平行な格子面が１枚存在する。

(4)　(各 1 点、計 3 点) ABC 面に平行で原点に最も近い格子面上に$-\vec{a},-\vec{b}/2,\vec{c}/3$の３点がある。このうち格子点は$-\vec{a}$である。他の２つの格子点を見つけるには$-\vec{a},-\vec{b}/2,\vec{c}/3$を通る面が　$\overrightarrow{OP}=-\vec{a}+t\left(-\vec{b}/2+\vec{a}\right)+u\left(\vec{c}/3+\vec{a}\right)=\left(-1+t+u\right)\vec{a}-\left(t/2\right)\vec{b}+(u/3)\vec{c}$　で表わされることから、　t=2, u=0　とおいて$\vec{a}-\vec{b}$、t=0, u=3 とおいて$2\vec{a}+\vec{c}$。

すなわち、$-\vec{a}$、$\vec{a}-\vec{b}$、$2\vec{a}+\vec{c}$。

３．(17 点)

(1)　(各 1 点、計 6 点)

fcc: $\vec{a} = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \end{pmatrix}$, $\vec{b} = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{pmatrix}$, $\vec{c} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{pmatrix}$

bcc: $\vec{a} = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{pmatrix}$, $\vec{b} = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{pmatrix}$, $\vec{c} = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{pmatrix}$

(2) （各 1 点、計 6 点）

fcc: $2\pi\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{1}{a} & \frac{1}{a} \end{pmatrix}$, $2\pi\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{1}{a} & -\frac{1}{a} \end{pmatrix}$, $2\pi\begin{pmatrix} -\frac{1}{a} & \frac{1}{a} & \frac{1}{a} \end{pmatrix}$

bcc: $2\pi\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & 0 & \frac{1}{a} \end{pmatrix}$, $2\pi\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{1}{a} & 0 \end{pmatrix}$, $2\pi\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{a} & \frac{1}{a} \end{pmatrix}$

(3) （計 5 点）

前の結果から格子定数 a の fcc 格子の逆格子は逆格子定数 4π/a の bcc 格子となることがわかる。L 点は体心(0,0,0)と角点(2π/a, 2π/a, 2π/a)の中央点であり、その座標は逆格子空間で(π/a, π/a, π/a)となる。